等位函數法應用在兩液滴連續撞擊壁面之三維數值計算

劉昭忠^{1*} 劉源昌² 余森年³

1.2.3 中州科技大學 電機與能源科技系

摘要

本研究以三維數值方法計算兩液滴連續撞擊壁面的暫態過程。數值方法上以結構性多區 塊、交錯網格系統進行空間離散,並採用有限體積法來依序疊代求解連續、動量等守恆方程 式,而流場中的速度與壓力間藕合以 SIMPLER 處理。在兩液滴連續撞擊壁面過程中,所產 生的合併及擴展現象,乃採用等位函數法加以處理之。為了驗證三維數值程式的準確性,先 計算雷諾數 400 及韋伯數 4.3 純水滴撞擊平板的暫態過程,並與實驗結果相比較,發現計算 結果非常準確。隨後,探討不同雷諾數的液滴 2 與固定雷諾數的液滴 1 兩者連續撞擊壁面的 過程,從數值計算過程中,不但可瞭解兩液滴撞擊的動態模式外,還能進一步獲知不同雷諾 數的液滴 2 對撞擊後兩液滴合併成單一液滴最大擴展距離之影響。

關鍵字:液滴、等位函數法、擴展距離



壹、緒論

自由液面乃是一移動邊界,其流場範圍或邊界形狀會隨時間變化,因此,不論從理論或 數值計算均很難處理。有鑑於此,遂利用 Osher 和 Sethian (1988,1994)提出一套無須簿記 (Bookkeeping)而能追蹤移動邊界的準則,亦即 Hamilton-Jacobi 等位函數(Level Set Function) 表示法,此法可輕易解決邊界合併、破裂等拓樸性質改變的問題,推展至三維計算亦相當直 援,故發展出等位函數法數值模擬程式,且應用於噴霧系統中液滴撞擊模式的研究。

在真實噴霧系統中,許多霧化的細小液滴會連續撞擊壁面,因此,從過去迄今,已有許 多文獻加以研究(1983,1991,1993,2000a,2000b,2007a,2007b)。由於霧化的液滴是連續撞擊 壁面,而液滴連續撞擊壁面之行為模式,到目前為止,則是較缺乏清楚詳細的探討,本研究 以三維數值方法計算兩液滴連續撞擊壁面的暫態過程,以便對此撞擊模式有更深入的瞭解。

以數值方法模擬液滴連續撞擊壁面,是一個非常複雜且困難的問題。因為在極短時間內, 由於液滴的撞擊作用,使得液滴彼此間與壁面會產生一連串的變化,所以如何捕捉液滴自由 表面(Free Surface)的變化,將是數值模擬的重點。

貳、文獻探討

Madejski (1983)為了克服液態金屬液滴撞擊平板的擴展過程,乃利用慣性力、黏滯力 及表面張力三者達平衡時的量階(Order of Magnitude)分析,發展出近似方法來捕捉液滴變 形擴展過程。Trapaga 和 Szekely (1991)則使用數值模式,配合標誌法和流體體積法(Volume of Fluid)的方式,來模擬平板上液滴的變形過程,並提出相關變數對此過程之影響。Fuki et al. (1993)使用有限元素法來模擬液滴垂直撞擊平板的過程。為了準確求得液滴複雜的變形行 為,配合特別的技巧來修正液滴變形後的計算網格,並提出雷諾數(Reynolds Number)、韋 伯數(Weber Number)對油滴擴展的影響。

最近,Siddhartha et al. (2007a)使用 VOF 方法和利用靜態接觸角(static contact angle: SCA)及動態接觸角(static contact angle: DCA)模式的數值程式,研究壁面性質對液滴撞擊之影響,發現液滴在接觸壁面初時,DCA 模式比 SCA 模式有更好的模擬效果。Hitoshi et al.(2007b) [14]以實驗和三維數值方法配合 VOF 方式,探討液滴撞擊角度對其在壁面動態行為之影響。當垂直撞擊時,液滴之動態形狀為對稱方式,當撞擊角度逐漸變小時,其動態形狀也隨 之越不對稱,對於撞擊後期,發現沿著壁面之擴展距離隨著撞擊角度之變小而變長。

本研究以三維數值方法計算兩液滴連續撞擊壁面的動態過程,在捕捉液滴間的變形行為時,以Osher 和 Sethian (1988,1994)所提出的等位函數法 (Level Set Function)來解決邊界 合併破裂等拓樸性質改變的問題。為了驗證三維數值程式的準確性,先計純水滴撞擊平板的 暫態過程,並與實驗值做比較。隨後,探討不同雷諾數的兩液滴連續撞擊壁面的過程。



參、研究方法

一、物理及數學模式

本研究主要是模擬兩液滴撞擊壁面的動態過程(圖 1),並利用等位函數法來計算液氣之 界面。統御方程式分別為:



圖 1. 兩液滴連續撞擊壁面示意圖

連續方程式:

$$\nabla \cdot (\rho u) = 0 \tag{1}$$

動量方程式:

$$u_t + (u \cdot \nabla)u = \frac{1}{\rho} \left(-\nabla p + \nabla \cdot (2\mu\tau) \right) + k\delta(s)n$$
⁽²⁾

在等位函數法中,對互不相溶的兩種流體而言,其流體粒子的密度與黏性係數均保持不 變,即

$$\rho_t + (u \cdot \nabla)\rho = 0 \tag{3}$$

$$\mu_t + (u \cdot \nabla)\mu = 0 \tag{4}$$

在平板邊界條件方面,若使用無滑邊界條件,將造成界面無法在平板移動之數值困難, 若以完全滑動方式處理,則又與黏性流理論相違背,故本研究中的等位函數法採取所謂部分 滑動條件(沈澄宇等人,2003)來解決此一問題。



二、等位函數法

以傳統的數值方法求解式(3)和(4),常因兩流體界面處的密度與黏性係數急遽變化而 產生嚴重的數值擴散現象。因此,本研究利用等位函數法〔Osher and Sethian, 1988,1994〕來 捕捉此一界面,以避免此一現象的發生。

在等位函數法中,以¢代表等位函數,其值在流體1中大於零,在流體2中小於零,則¢ 之零位面正好就是兩流體之界面。若將空間中某一點¢之初始值設為該點與界面之法向距 離,其正負號以該點所屬之流體來決定,則¢零位面之移動方式即是兩流體界面之移動方式, 其方程式如下:

$$\phi_t + (u \cdot \nabla)\phi = 0 \tag{5}$$

由於 $^{\phi}$ 為平滑函數,故其數值求解要比 ρ 或 μ 容易,而 ρ 或 μ 則可直接由下式求得:

$$\rho = \begin{cases}
1 & \text{if } \phi > \alpha \\
\rho_2 / \rho_1 & \text{if } \phi < -\alpha \\
\overline{\rho} + \Delta \rho \sin(\pi \phi / 2\alpha) & \text{if } |\phi| \le \alpha
\end{cases}$$
(6)

其中

$$\overline{\rho} = (\rho_2 + \rho_1)/2\rho_1$$

$$\Delta \rho = (\rho_1 - \rho_2)/2\rho_1$$
(7)

$$\mu = \begin{cases} 1 & \text{if } \phi > 0 \\ \mu_2 / \mu_1 & \text{if } \phi < 0 \\ (\mu_2 + \mu_1) / 2\mu_1 & \text{if } \phi = 0 \end{cases}$$
(8)

其物理意義在於將原為零厚度之流體界面擴展成厚度為 α 之帶狀區,其中 α -O(h),h 為格點尺度。此外,式(5)成立的重要前提是 ϕ 為一距離函數。然而,只有 ϕ 的初始值满足 此一條件,其後流場的變化會使 ϕ 無法保證仍能保持為距離函數。再者,若界面發生合併現 象時, ϕ 在界面處將呈現不連續的函數值。因此,為求等位函數之空間導數不但具高階準確 度且又不產生數值振盪現象,就必須對 ϕ 做"重初始化"(Reinitialization),使其保持為距離函 數(沈澄宇等人,2003)。

本研究的另一個重要課題便是如何確保質量守恆,其作法是在每一個時間步階結束之前,將損失的質量補回,而將多餘的質量剔除,也就是將各點等位函數值同時加或減一個常



數,使其所對應的體積(質量)維持在設定值(沈澄宇等人,2003)。

三、數值模式

本研究以(沈澄宇等人,2003;劉昭忠等人,2002;S. V. Patankar, 1980; P. J. Van Doormal and G. D. Raithby,1984)所發展的數值模式來求解問題,此模式採用結構性多區塊、非交錯網 格及有限體積法來進行計算空間之離散處理,並採用依序疊代法求解連續方程式、動量方程 式以及等位函數運動方程式。不可壓縮流場速度與壓力之間的弱藕合則以SIMPLER處理(S. V. Patankar, 1980; P. J. Van Doormal and G. D. Raithby,1984),對流項、黏滯項或擴散項的相 關物理量皆以二階的中央差分法來處理。時間離散則採用具二階準確度的 Crank-Nicolson 算 則。離散化後的所得到的線性代數方程式,則是用 SIP (Strongly Implicit Procedure)(H. L. Stone. (1968)求解。

肆、結果與討論

為了與液滴碰撞平板過程的實驗值〔楊鴻進,2003〕比較,選用水液滴直徑為420μm、 撞擊速度為0.86m/s,獲得無因次化參數之雷諾數(Re)為400,而韋伯數(We)為4.3。

整個三維計算區域,在 X 方向為 20 倍液滴半徑,Y 方向為 8 倍液滴半徑,Z 方向為 5 倍無因次化液滴半徑,所用的格點數分別為 201×81×51 (case1) 如圖 1 與 401x81×51 (case2), 並擴大計算區域,採用 X 方向為 30 倍液滴半徑,Y 方向為 8 倍液滴半徑,Z 方向為 5 倍液 滴半徑,所用的格點數為 301x81×51 (case3)。



圖 2. 結構性多區塊網格圖



將計算結果與實驗值比較(圖 3-4)得知,雖未考慮乾壁面粗造度之影響,但隨著無因 次化時間變化的中央液面高度(圖 3) 和擴展距離(圖 4)其最大誤差範圍大概在 7%以下, 因此其計算模擬結果可謂相當準確。



圖 3 液滴撞擊平板過程中的無因次化中央液面高度時序曲線圖



圖 4 液滴撞擊平板過程中的無因次化擴展距離時序曲線圖

一、撞擊模式(一)

兩顆無因次化半徑相等之純水液滴連續撞擊壁面,液滴1和液滴2的中心分別距離壁面為1.5倍和4.5倍的無因次化液滴半徑,兩者雷諾數(Re)為100,韋伯數(We)為2.212。 當液滴1撞擊壁面後,克服壁面之摩擦力及本身表面張力,開始產生擴展過程,直至液滴1 到達最大擴展距離時,液滴2均未接觸液滴1(圖 5a-5b)。在液滴1收縮過程初期,液滴2 開始與液滴1產生合併,在合併過程中,液滴1的擴展過程減緩,直至兩者完全合併(圖 5c), 合併後的單一液滴開始沿著壁面(X 軸)兩個方向產生擴展(圖 5d),當擴展到極限時,被 表面張力拉回,而造成來回振盪。此振盪模式符合單一液滴撞擊平板之行為模式。





圖 5. 不同無因次化時間兩液滴連續撞擊壁面之擴展圖:(a)t=100,(b)t=500,(c)t=800, (d)t=1000,(e)t=1500。



從兩者合併之 XY 平面速度分佈圖得知 (圖 6a-6b),當液滴 2 與液滴 1 接觸瞬間,兩者 邊界開始合併 (圖 5a),液滴 2 動量逐漸傳遞於液滴 1 內部,而液滴 1 擴展內部之流場,因 液滴 1 表面張力的作用,使擴展邊界之流場沿液滴 1 之形狀往上流動,而消耗液滴 2 部分之 動量,此時,液滴 1 擴展過程減緩,直至兩者合併完成。當合併成單一液滴後,液滴開始沿 著壁面 (X 軸)兩個方向產生擴展 (圖 6c),整個擴展模式如同單一液滴撞擊平板之行為模 式。





(c)

圖 6. 不同無因次化時間兩液滴連續撞擊壁面 XY 平面速度流場圖:(a)t=600,(b)t=800, (c)t=1500.

二、撞擊模式 (二)

液滴1以雷諾數為100,液滴2以雷諾數300連續撞擊壁面。由其結果發現,液滴1撞 擊壁面,產生擴展過程初期,液滴2已撞擊液滴1(圖7a-7b)。因液滴2動量為液滴1動量



之三倍,所以兩液滴在極短的時間內合併成單一液滴,隨後,單一液滴開始沿著壁面(X軸) 兩個方向產生擴展(圖7c-7d)。





(b)



(c)

(d)

圖 7. 不同無因次化時間兩液滴連續撞擊壁面之擴展圖:(a)t=100,(b)t=300,(c)t=500, (d)t=1000。

三、撞擊模式 (三)

相對地,液滴1以雷諾數為300,液滴2以雷諾數100連續撞擊壁面。因液滴1動量為 液滴2動量之三倍,因此在極短的時間內,液滴1快速由擴展至收縮,當液滴1收縮至最小 擴展距離時,液滴2才已撞擊液滴1(圖 8a-8c),隨後,合併成單一液滴沿著壁面(X 軸)



兩個方向產生擴展(圖 8d)。在合併過程中,撞擊模式(一)和撞擊模式(三)中液滴1的 動量向上,而液滴2的動量向下,但撞擊模式(三)液滴1之動量遠大於撞擊模式(一)液 滴1之動量,所以在平衡兩液滴動量和表面張力時間較快,因此,兩液滴合併時間例三還是 例一為短(圖 5c-5 d, 8c-8d)。



 (b)
 (d)

 圖 8
 不同無因次化時間兩液滴連續撞擊壁面之擴展圖:(a)t=100,(b)t=500,(c)t=800,

(d) t= 1000。
 以雷諾數分別為 100、200、300 的液滴 2 和雷諾數 100 的液滴 1 連續撞擊壁面,對雷諾

數 100 的液滴 2 而言,液滴 1 與其接觸合併時,已在收縮過程,兩液滴會相互抵銷部分動量, 所以合併後之最大擴展距離最短。而雷諾數分別為 200、300 的液滴 2 與液滴 1 接觸合併時,



液滴1在壁面已產生擴展運動,兩液滴的動量方向相同屬於加成作用,且雷諾數 300 又比雷諾數 200 之效果為佳,所以合併後之最大擴展,雷諾數 300 的液滴2最大,雷諾數 200 的液滴2 次之,如圖9。



圖 9. 相同雷諾數液滴 1 與不同雷諾數液滴 2 連續撞擊壁面之最大擴展距離圖。

伍、結論

本研究以三維結構性多區塊網格數值方法計算兩液滴連續撞擊壁面的暫態過程。為了捕捉整個過程中液滴撞擊的邊界變化,在此採用等位函數法加以處理。為了驗證程式準確性, 先以雷諾數為400及韋伯數為4.3,計算液滴撞擊平板的暫態過程,並與實驗結果相比較,發現計算結果非常準確。隨後,探討不同雷諾數的液滴2與固定雷諾數的液滴1兩者連續撞擊 壁面的過程,從數值計算過程中,不但可瞭解兩液滴撞擊的動態模式外,還能進一步獲知不 同雷諾數的液滴2對撞擊後兩液滴合併成單一液滴最大擴展距離之影響。

符號說明

Re 雷諾數 [Re =
$$\frac{\rho u D}{\mu}$$
] h^* 無因次化中央液面高度 $[h^* = \frac{h}{D}]$
We 韋伯數 $[We = \frac{\rho u^2 D}{\sigma}]$ d^* 無因次化擴展距離 $[d^* = \frac{d}{D}]$
 t^* 無因次化時間 $[t^* = \frac{tv}{D}]$



- h 液面高度 D 液滴直徑
- ρ 水之密度 t 時間
- υ 撞擊速度 μ 黏滯係數
- σ 表面張力
- T 黏滯剪力張量
- △ Dirac delta 函數
- κ 雨相界面的曲率半徑
- d 擴展距離
- n 垂直於兩相界面向外之單位向量

上標

* 無因次

參考文獻

- [1] Y. Gu and D. Li. (2000a). Liquid drop spreadings on solid surfaces at low impact speeds. Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects, Vol. 163, pp. 239-245.
- [2] M. Bussmann, S. Chandra and J. Mostaghimi. (2000b). Modeling the splash of a Droplet Impacting a Solid Surface. Phys. Fluids, Vol. 12(12), pp. 3121-3132.
- [3] G. Trapaga and J. Szekely. (1991). Mathematical modeling of the isothermal impingement of liquid droplets in spray processes. Metall. Trans. B 22, 901.
- [4] J. Madejski. (1983). Droplets on impact with a solid surface. Int. J. Heat Mass Transer 26, 1095.
- [5] J. Fukai, Z. Zhao, D. Poulikakos, C. M. Megaridis and O. Miyatake. (1993). Modeling of the deformation of a liquid droplet impinging upon a flat surface. Phys. Fluids A 5 (11), 2588.
- [6] S. Osher and J. A. Sethian. (1988). Fronts propagating with curvature dependent speed: algorithms based on Hamilton-Jacobi formulation. J. Comput. Phys. 79(1), pp. 12-49.
- [7] M. Sssman, P. Smereka and S. Osher. (1994). A level set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow. J. Comput. Phys. 114, pp. 146-159.
- [8] S. V. Patankar. (1980). Numerical heat transfer and fluid flow. Mcgraw-Hill, NewYork.
- [9] P. J. Van Doormal and G. D. Raithby. (1984). Enhancements of the SIMPLE method for predicting incompressible fluid flows. Numer. Heat Transfer, 7, pp. 147-163.
- [10] H. L. Stone. (1968). Iterative solution of implicit approximations of multidimensional partial differential equations. SIAM J. Numer. Anal., 5, pp. 530-558.
- [11] Hitoshi Fujimoto, Yu Shiotani, Albert Y. Tong, Takayuki Hama and Hirohiko Takuda.



(2007a). Three-Dimensional numerical analysis of the deformation behavior of droplets impinging onto a solid substrate. International Journal of Multiphase Flow, Vol. 33, pp. 317-332,.

- [12] Siddhartha F. Lunkad, Vivek V. Buwa, and K.D.P. Nigam. (2007b). Numerical simulation of drop impact and spreading on horizontal and inclined surfaces. Chemical Engineering Science, Vol. 62, pp. 7214-7224.
- [13] 楊鴻進 (2003)。液滴撞擊之實驗研究及現象分析。國立台灣大學機械工程學研究所碩士 論文。
- [14] 沈澄宇,劉昭忠,游輝宏。(2003)。等位函數法數值分析程式開發。船舶技術發展計畫 結案報告.
- [15] 劉昭忠、游輝宏、鍾孟軒、沈澄宇、施仁傑、周朝宜 (2002),液滴撞擊平板暫態過程之 數值模擬,第九屆全國計算流體力學學術研討會,台南, pp. 195-202。



A Level Set Approach for Three Dimensional Numerical Computation of Two Drops Impinging upon A Solid Surface in Sequence

Chao-Chung Liu^{1*}, Yuan-Chang Liou², Sun-Nien Yu³

^{1,2,3} Department of Electrical Engineering and Energy Technology, Chung Chou University of Science and Technology

Abstract

The investigation is to develop a three dimensional numerical code for transient impingement phenomenon of two droplets upon a solid wall in sequence. In this code, the structured single-block and staggered grid system are adopted for discretization of the space domain, while the finite volume method is applied to solve iteratively the governing equations of mass and momentum. The weak coupling among the velocities and pressure is handled by SIMPLER methods. In order to capture the boundary of the spreading of a droplet, a level set approach is considered due to the advantage of handling the incorporation and breakup of the boundary easily. The numerical results of water droplet impinging upon a flat surface are in good agreement with the experimental results with Re=200 and We=2.15. Furthermore, a backward droplet with the different Reynolds number, and a forward droplet with the same Reynolds number impact continuously on a solid surface. The mechanism of temporal spreading process of two droplets, the maximum spread distance is influenced by a backward droplet with the different Reynolds number.

Keywords: Droplet, Level-Set Method, Spread Distance.

